

# TopologicalNumbers.jl: 用于拓扑数计算的 Julia 包

Keisuke Adachi <sup>1,2</sup> \*  and Minoru Kanega <sup>2</sup> \* 

<sup>1</sup>*Department of Physics, Ibaraki University, Mito, Ibaraki, Japan*

<sup>2</sup>*Department of Physics, Chiba University, Chiba, Japan*

 *Corresponding author:*

\* *These authors contributed equally.*

## 总结

拓扑数.jl 是一个开源的 Julia 包，旨在计算拓扑不变量——描述凝聚态物理中材料特性的数学量。这些不变量，如陈数和  $\mathbb{Z}_2$  不变量，对于理解像拓扑绝缘体和超导体这样的非常规材料至关重要，这些材料在高级电子学、自旋电子学和量子计算中有潜在的应用（[Hasan & Kane, 2010](#); [Nayak et al., 2008](#); [Qi & Zhang, 2011](#)）。该包为研究人员和教育工作者提供了易于使用且高效的工具集，以跨不同维度和对称类计算这些不变量，促进了新材料拓扑相的探索与发现。

## 需求说明

理解材料的性质对于固态物理学至关重要。例如，电导率是衡量材料传导电流能力的关键物理量。通常，当一个弱电场被施加到材料上时，如果体内的量子本征态存在并且电子可以跃迁至这些状态，则该材料表现出有限的电导率并表现为金属行为。反之，如果没有这样的状态，电导率将很低，并且材料表现得像绝缘体。自 20 世纪 80 年代以来，人们发现某些材料具有体内是绝缘性而表面有导电电子态的状态（[Hasan & Kane, 2010](#); [Qi & Zhang,](#)

2011)。这些材料被称为拓扑电子系统，包括量子霍尔绝缘体和拓扑绝缘体。由于这些新颖的特性，广泛的研究被用于识别候选材料并评估它们的特征。

表面导电态的特征由动量空间中量子本征态的拓扑结构决定。拓扑数，如第一陈数、第二陈数和  $\mathbb{Z}_2$  不变量被用来表征这些性质 ( Kane & Mele, 2005; Thouless et al., 1982)。一个典型的例子是量子霍尔效应，在该效应中，向二维材料施加弱电场会导致与所施加的场垂直的电导率（霍尔电导）量化为有限值 ( Thouless et al., 1982)。霍尔电导率  $\sigma_{xy}$  由第一陈数  $\nu \in \mathbb{Z}$  描述，其值为  $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}\nu$ ，其中  $e$  是基本电荷， $h$  是普朗克常数。其他拓扑数同样作为描述系统的重要的物理量，这取决于它们的维度和对称性类别 ( Ryu et al., 2010)。

获得拓扑数通常需要大量的数值计算，在达到收敛之前可能需要相当大的计算努力。因此，创建简化这些量的计算工具将促进物质拓扑相的研究。已经开发了几种方法以实现某些拓扑数的有效计算 ( Fukui et al., 2005; Fukui & Hatsugai, 2007; Mochol-Grzelak et al., 2018; Shiozaki, 2023)。然而，由于每种方法通常专门针对特定的维度或对称类，因此经常必须为每个问题分别实现算法。我们的项目，拓扑数.jl，旨在提供一个能够高效且容易地计算各种维度和对称类中的拓扑数的软件包。

该包目前包括几种计算拓扑数的方法。第一种是 Fukui–Hatsugai–Suzuki (FHS) 方法，用于计算二维固态系统中的第一个陈数 ( Fukui et al., 2005)。第一个陈数通过在布里渊区内对 Berry 曲率进行积分获得，而 Berry 曲率则由哈密顿量的本征态得出。FHS 方法通过对布里渊区内的 Berry 曲率进行离散化来实现高效计算。基于 FHS 方法已经提出几种用于计算各种拓扑数的方法。其中一种方法可以计算四维系统中的第二个陈数 ( Mochol-Grzelak et al., 2018)。在具有时间反演对称性的二维系统中，可以计算  $\mathbb{Z}_2$  不变量 ( Fukui & Hatsugai, 2007; Shiozaki, 2023)。FHS 方法也适用于识别三维系统中的外尔点和外尔节点 ( Du et al., 2017; Hirayama et al., 2015, 2018; Yang et al., 2011)。

目前，还没有一个全面的 Julia 软件包实现了所有这些计算方法。在其他平台上，使用不同方法的软件包——例如基于 Wannier 电荷中心 ( Soluyanov, 2011) 或 Wilson 环路 ( Yu et al., 2011) 的方法——是可用的。例如，Z2Pack ( Gresch et al., 2017) 是一个广泛用于计算  $\mathbb{Z}_2$  不变量和第一陈数的

基于 Python 的工具。瓦尼尔工具 (Wu et al., 2018) 提供了强大的功能来分析拓扑材料，但它是用 Fortran 实现的，这可能会给一些用户带来学习曲线陡峭的问题。

拓扑数.jl 通过提供高效、纯 Julia 语言的实现而区别开来。Julia 以其高性能和用户友好的语法而闻名。该软件包支持多种拓扑不变量，跨越多个维度和对称性类别，包括第一和第二陈数以及  $\mathbb{Z}_2$  不变量。它还通过 MPI.jl 提供并行计算能力，增强了大规模问题的计算效率。通过利用 Julia 的多重分派特性，我们采用了一致的接口使用问题、算法和解决风格——类似于微分方程.jl (Rackauckas & Nie, 2017)——以提高扩展性。借助这些功能，拓扑数.jl 达到了性能、易用性、可维护性和扩展性的独特平衡，提供了不同于其他库的另一种视角，而不是直接与其竞争。

此外，为了计算  $\mathbb{Z}_2$  不变量，这需要计算 Pfaffian，我们将 PFAPACK 移植到了 Julia。PFAPACK 是一个用于计算斜对称矩阵的 Pfaffian 的 Fortran/C++/Python 库 (Wimmer, 2012)。我们的包包括所有原始提供函数的纯 Julia 实现。虽然斜线性代数.jl 存在一个官方的 Julia 包，用于计算实数斜对称矩阵的 Pfaffian，据我们所知，拓扑数.jl 是第一个提供处理复数斜对称矩阵的纯 Julia 实现的官方包。

## 使用

用户可以轻松地使用本包中包含的各种方法计算拓扑数。在最简单的情况下，他们只需要提供一个根据波数返回哈密顿矩阵的函数。通过创建相应的问题实例并调用解决函数 (解决问题) 来进行计算。该包还提供了计算相图函数，它允许通过指定问题和参数范围 (计算相图 (问题, 范围...)) 来计算一维或二维参数空间中的拓扑数。

此外，诸如显示频段、一维图和二维图等效用函数可用于可视化能带结构和相图。我们还提供了各种模型哈密顿量，例如苏—施里弗—希格 (SSH) 模型 (Su et al., 1979) 和哈尔丹模型 (Haldane, 1988)，允许用户快速测试功能并学习如何使用这些特性。

## 致谢

作者感谢 Takahiro Fukui 的富有成效的讨论。M. K. 得到了 JST 的支持，具体为大学奖学金计划以促进科学技术创新（资助号 JPMJFS2107），以及 JST SPRING（资助号 JPMJSP2109）。

## 参考文献

- 杜, Y., 鲍, X., 王, D., 阚, E., 段, C.-G., 萨夫拉索夫, S. Y., 及万, X. (2017). 强自旋轨道耦合系统  $\text{InNbX}_2$  ( $x = \text{s, se}$ ) 中拓扑节点线和类型-II Weyl 节点的出现物理评论 *B*, *96*(23), 235152. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.235152>
- 福井, T., & 服ガイ, Y. (2007). 量子自旋霍尔效应在三维材料: 格计算的  $Z_2$  拓扑不变量和它的应用到生物和样本. 日本物理学会杂志, *76*(5), 053702. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.053702>
- 福井, T., 榛内, Y., & 木, H. (2005). 陈数字在离散化布里渊区: 高效方法的计算 (自旋) 霍尔电导率. 物理学社. 日本., *74*(6), 1674–1677. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674>
- Gresch, D., Autès, G., Yazyev, O. V., Troyer, M., Vanderbilt, D., Bernevig, B. A., & Soluyanov, A. A. (2017). Z2Pack: 数值混合汪尼尔中心的实现以识别拓扑材料. 物理评论 *B*, *95*(7), 075146. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.075146>
- 哈代, F.D.M.(1988). 无朗道能级的量子霍尔效应模型: 凝聚态实现的“奇偶性异常”. 物理. 评论. 快报., *61*(18), 2015–2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015>
- Hasan, M. Z., & Kane, C. L. (2010). 综述: 拓扑的绝缘体. *Rev. 模. 物.*, *82*(4), 3045–3067. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045>
- 平山, M., 岡河, R., 石桥, S., 村上, S., & 宫中, T. (2015). Weyl 节点和自旋纹理在三方碲和硒中. 物理. 评论. 快报., *114*(20), 206401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.206401>
- 平山, M., 奥川, R., & 村上, S. (2018). 拓扑学准金属研究通过从头计算. 日本物理学会期刊, *87*(4), 041002. <https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.041002>
- Kane, C. L., & Mele, E. J. (2005).  $Z_2$  拓扑序和量子自旋霍尔效应. 物理. 评论. 快报., *95*(14), 146802. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802>

46802

- Mochol-Grzelak, M., Dauphin, A., Celi, A., & Lewenstein, M. (2018). 计算四维系统中第二个陈省身数的有效算法. 量子科学与技术, 4(1), 014009. <https://doi.org/10.1088/2058-9565/aae93b>
- 奈亚克, C., 西蒙, S. H., 斯特恩, A., 弗里德曼, M., & 达斯萨玛, S. (2008). 非阿贝尔任意子与拓扑量子计算. 修订. 模. 物., 80(3), 1083–1159. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1083>
- Qi, X.-L., & Zhang, S.-C. (2011). 拓扑绝缘体和超导体. 修订. 模. 物., 83(4), 1057–1110. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.1057>
- Rackauckas, C., & Nie, Q. (2017). 微分方程.jl—执行性能优秀的和功能丰富的生态系统在茱莉亚中的求解微分方程. *J. 开放研究. 软件*, 5(1), 15–15. <https://doi.org/10.5334/jors.151>
- Ryu, S., Schnyder, A. P., Furusaki, A., & Ludwig, A. W. W. (2010). 拓扑绝缘体和超导体: 十重态方式与维度层级. 新物理学杂志, 12(6), 065010. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/6/065010>
- Ⓛ崎, K. (2023). 凯恩-梅勒的离散公式  $\mathbb{Z}_2$  不变量 (编号 arXiv:2305.05615). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.05615>
- Soluyanov, A. A. (2011). 无反演对称性下的拓扑不变量计算. 物理评论 B, 83(23). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.235401>
- 苏, W. P., 施瑞弗, J. R., & 赫格, A. J. (1979). 聚乙炔中的孤子. 物理. 复习. 快报., 42(25), 1698–1701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698>
- Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P., & den Nijs, M. (1982). 量化霍尔电导率在一个二维周期势中. 物理. 评论. 快报., 49(6), 405–408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405>
- Wimmer, M. (2012). 算法 923: 高效数值计算的帕夫方阵对于密集的和带状斜对称矩阵. *ACM 交易. 数学. 软件.*, 38(4), 30:1–30:17. <https://doi.org/10.1145/2331130.2331138>
- 吴, Q., 张, S., 宋, H.-F., Troyer, M., & Soluyanov, A. A. (2018). 瓦尼尔工具: 一个开源软件包用于新型拓扑材料. 计算. 物理. 通讯, 224, 405–416. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.09.033>
- 杨, K.-Y., 卢, Y.-M., & 阮, Y. (2011). 量子霍尔效应在韦伊半金属中: 可能在钳夹铋化合物中的应用. 物理评论 B, 84(7), 075129. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075129>

于, R., 齐, X. L., Bernevig, A., 方, Z., & 戴, X. (2011).  $\mathbb{Z}_2$  拓扑不变量的等效表达式用于带绝缘体使用非阿贝尔贝里连接。物理评论 *B*, 84(7), 075119. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075119>